ソリトン系の統計力学

東北大理　佐々木一夫
都築　俊夫

１次元ソリトン系［サイン・ゴルドン（ＳＧ）系や ϕ^4 系など］の古典統計力学は、Transfer 積分（ＴＩ）法や、フォノンとソリトンを素励起とみなす現象論的方法によって調べることができる。[1] 自由エネルギーや静的相関関数に対する解析的な表式は、低温極限において得られており、２つの方法による結果は一致する。我々の目的は、これらの表式に対する有限温度の補正項を計算し、ＴＩ方程式を数値的に解いた結果[2]と比較することである。

次のハミルトニアンで記述される１次元ソリトン系を考える。

$$H = Aa\sum_n \left[\frac{1}{2}\dot{\phi}_n^2 + \frac{1}{2}\frac{C_0^2}{a^2}(\phi_{n+1} - \phi_n)^2 + \omega_0^2 V(\phi_n) \right] \tag{1}$$

ここで、ϕ_n は n 番目の格子点における場の量（無次元）、a は格子定数、C_0 と ω_0 は系に特徴的な速さと振動数、A は［エネルギー］・［長さ］$^{-1}$・［時間］^{2} の次元を持った定数である。以下で扱うＳＧ系と ϕ^4 系のポテンシャル $V(\phi)$ は、

$$V(\phi) = \begin{cases} 1 - \cos\phi \quad , \ SG & (2a) \\ \frac{1}{8}(\phi^2 - 1)^2 \ , \ \phi^4 & (2b) \end{cases}$$

で与えられる。(1) を連続体近似して得られる運動方程式の特解として、ソリトン解があり、その静止エネルギー E_s は、ＳＧ系，ϕ^4 系でそれぞれ $E_s = 8A\omega_0 C_0$, $\frac{2}{3}A\omega_0 C_0$ である。

ＴＩ法によると、これらの系の古典統計力学の問題は、連続体近似の極限で、次のシュレーディンガー型方程式の固有値問題に帰着する。

$$\left[-\frac{1}{2m^*}\frac{d^2}{d\phi^2} + V(\phi) \right] \psi_n(\phi) = \varepsilon_n \psi_n(\phi) \ , \quad \sqrt{m^*} = A\omega_0 C_0 / k_B T \tag{3}$$

自由エネルギーは、最低固有値ε_0から求められるし、静的相関関数は、いくつかの固有値ε_nと固有関数ψ_nから計算することができる。

十分低温では($m^* \gg 1$)、ε_0を$\varepsilon_0 = E_0 - t_0$のように、2つの部分に分けて考える。ここで、$E_0$はポテンシャル$V(\phi)$の1つの谷の底で振動する振動子の最低固有値であり、t_0はトンネル効果によるエネルギーの下がりを表わす(この効果は非常に小さい:$t_0 \ll E_0$)。「現象論」との対応でいうと、E_0とt_0からの自由エネルギーへの寄与は、それぞれフォノンとソリトンの自由エネルギーに相当する。E_0を計算するには、調和近似をもとにして、非調和性を摂動として扱えばよい。このときの展開パラメーターは$t \equiv k_BT/E_S$ ($\ll 1$)になっている。一方、トンネル効果t_0の低温展開の第1項は、WKB法とWeber関数を併用して計算されている[3)]が、この方法では高次の項を計算することは困難と思われる。ここでは、「修正WKB法」[4)]と<u>Green関数法</u>とを組み合わせて有限温度の補正項を計算した結果[5)]を紹介する。t_0に対する展開パラメーターは$e^{-1/t}$であり、$e^{-1/t}$の最低次の項に対するtのべキの補正項を計算した結果は

$$t_0 = \begin{cases} 16\sqrt{\dfrac{2}{\pi}}\, t^{1/2} e^{-1/t}\left[1 - \dfrac{7}{8}t - \dfrac{59}{128}t^2 - \cdots\right], & SG \quad (4a) \\[2ex] 2\sqrt{\dfrac{2}{3\pi}}\, t^{1/2} e^{-1/t}\left[1 - \dfrac{71}{72}t - \dfrac{6299}{10368}t^2 - \cdots\right], & \phi^4 \quad (4b) \end{cases}$$

こうして求めたE_0とt_0から自由エネルギーが得られ、したがって比熱も計算できる。図1にSG系の1粒子当りの比熱Cを示す。ϕ^4系もほぼ同じ振舞を示す。Cは、フォノン部分C_0とソリトン部分C_tとの和であり、$t = t_m \sim 0.26$ (SG), ~ 0.25 (ϕ^4)に

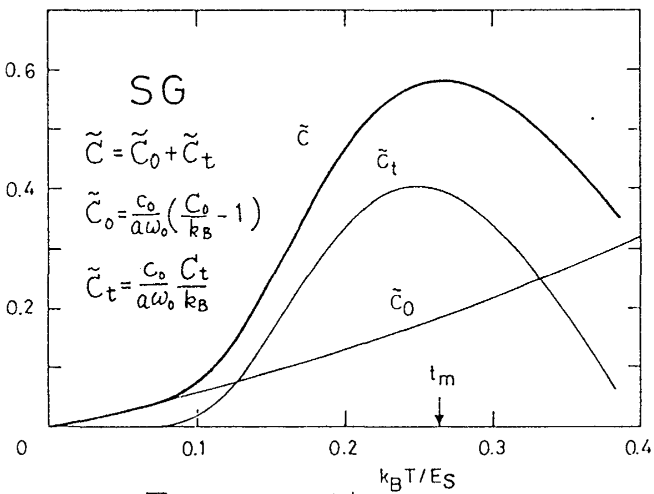

図1 SG系の比熱

ピークがあり、これがソリトンに起因することは図から明らかである。比熱のこのような振舞は、数値計算の結果 [$t_m \sim 0.22$ (SG), 0.21 (ϕ^4)][2] と定性的に一致する。

比熱のピークの物理的意味を考えてみよう。そのために、「現象論」から導かれる、ソリトン密度 n_s とソリトンによる自由エネルギー密度への寄与 F_t との関係 $n_s = -F_t / k_B T$ を利用する ($F_t = -A\omega_0^2 t_0$)。n_s を温度の関数としてプロットしてみると、n_s の増加率が $t = t_m$ の近くで最大になることがわかる。この事実から、比熱のピークは、熱的に励起されたソリトンによる Schottky 型の異常比熱であると解釈できる。

ソリトンに支配される相関関数の相関距離 ξ の補正項も直ちに計算できる。(4) と同じ精度の計算で $\xi^{-1} = -2F_t / k_B T = 2n_s$ となり、これは「現象論」から導かれる関係と同じである。したがって、少なくとも (4) の精度までは、ソリトンの理想気体近似は有効であるといえよう。しかし、「現象論」による有限温度の補正項の計算結果は、現在のところまだ得られてないようだ。[注) 上記の結果は SG 系と ϕ^4 系に関するものであり、Double-Quadratic 系 : $V = \frac{1}{2}(1-|\phi|)^2$ では、上記の ξ と F_t の関係は成立せず ($T \to 0$ では成立) 、(4) の精度ですでに理想気体近似が破れているらしい。]

我々の用いた Green 関数法は、見通しよく、しかも機械的に高次の項を計算でき、従来の方法[3] よりも計算が簡単であるという点を強調しておきたい。さらに、物理的内容のより豊かな、2成分ソリトン系 (複素スカラー場やスピン系など) の古典統計力学 [(3) に対応する式は「2次元シュレーディンガー方程式」になる。] を調べるときにも有効であり、従来の方法より見通しよく計算ができる。

REFERENCES

1) J. F. Currie et al, Phys. Rev. B22 (1980), 477.
2) T. Schneider and E. Stoll, Phys. Rev. B22 (1980), 5317.
3) R. M. DeLeonardis and S. E. Trullinger, Phys. Rev. A20 (1979), 2603.
4) Y. Okwamoto, H. Takayama and H. Shiba, J. Phys. Soc. Japan 46 (1979), 1420; K. Sasaki, to appear in Prog. Theor. Phys. 67 #2 (1982).
5) K. Sasaki, to appear in Solid State Commun.